

УДК 539.120.61:535.326

ЛЭМБОВСКИЙ СДВИГ АТОМОВ В ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

Р.Х. Гайнутдинов, Е.В. Зайцева, М.А. Хамадеев

Аннотация

Исследуется проблема взаимодействия атомов, находящихся в фотонных кристаллах, с собственным полем излучения. Показано, что в этом случае лэмбовский сдвиг значительно отличается от лэмбовского сдвига атомов в вакууме. Обсуждается влияние дисперсионных соотношений на лэмбовский сдвиг атомов в фотонных кристаллах.

Ключевые слова: фотонные кристаллы, лэмбовский сдвиг.

Введение

Большой интерес, который в настоящее время вызывают исследования фотонных кристаллов, обусловлен их широким применением [1, 2]. Так, например, использование фотонных кристаллов в волоконной оптике способно снизить потери сигнала на несколько порядков. С помощью фотонных кристаллов можно существенно увеличить КПД источников света. Фотонные кристаллы также могут служить основой для создания электрооптических или полностью оптических интегральных схем. Одним из наиболее перспективных направлений является создание низкопороговых лазерных излучателей для видимого и ближнего инфракрасного диапазонов благодаря контролю спонтанного излучения внутри фотонного кристалла. Несмотря на то что механизм является достаточно очевидным и связан с наличием спектральной области (фотонной запрещенной зоны), в пределах которой распространение света в фотонном кристалле подавлено во всех или в некоторых избранных направлениях, при описании такого контроля мы сталкиваемся с рядом концептуальных проблем, связанных с тем, что квантовая электродинамика (КЭД) в фотонных кристаллах существенно отличается от КЭД в вакууме.

Обычно при исследовании вопросов, связанных со спонтанным излучением атомов в фотонных кристаллах, используют методы квантовой электродинамики в вакууме [3, 4]. Однако вопрос о применимости этих методов к описанию спонтанного излучения КЭД поправок в условиях фотонных кристаллов остается открытым, поскольку имеется существенное различие в дисперсионных соотношениях фотона. Под дисперсионными соотношениями понимается математическая связь частоты ω с волновым вектором \mathbf{k} . В вакууме они имеют тривиальный линейный вид. В фотонных кристаллах же они искажаются и обладают разрывами, соответствующими фотонным запрещенным зонам. Как правило, для изучения спонтанного излучения интересуются особенностями дисперсионных соотношений лишь в окрестностях рассматриваемых частот. При этом ограничиваются приведенными зонными схемами или дисперсионными диаграммами, в которых как одномерные, так и многомерные дисперсионные зависимости умещают на плоском рисунке путем перебора значений координат волнового вектора вдоль траектории, ограничивающей неприводимую зону Бриллюэна. Эта процедура полностью заимствована

из физики твердого тела. При этом для расчетов используются стандартные методы КЭД [5]. Однако их использование требует осторожности, поскольку в данном случае ультрафиолетовое поведение амплитуд существенно отличается от аналогичного поведения в вакууме. Ключевым моментом является тот факт, что в амплитуды процессов входят вклады от всех фотонов, включая фотоны с большими импульсами. Поэтому при анализе величин, зависящих от дисперсионных соотношений, мы не можем ограничиваться лишь определенными областями импульсов. В данной работе исследуются проблемы, которые возникают при описании лэмбовского сдвига в атомах, находящихся в фотонных кристаллах, и показываем, что в этот сдвиг существенный вклад дают КЭД процессы, которые не проявляются при описании спектров излучения атомов в вакууме.

1. Квантовая электродинамика в фотонных кристаллах

При описании спонтанного излучения атомов в фотонных кристаллах необходимо учитывать процессы взаимодействия связанных электронов с собственным полем излучения. Эти процессы, которые, в частности, приводят к лэмбовскому сдвигу спектральных линий атомов, должны быть очень существенными при частотах виртуальных фотонов в области запрещенной зоны из-за пленения излучения соответствующей частоты. Однако при описании процессов взаимодействия атомов с собственным полем излучения необходимо учитывать вклады всех виртуальных фотонов, включая фотоны с энергиями много большими, чем характерные частоты запрещенных зон в кристалле. При этом мы сталкиваемся с обычной проблемой КЭД: мы не можем ограничиться конечной областью частот, и, более того, вклад от процессов с участием виртуальных фотонов с произвольно большими частотами является бесконечным. Это так называемые ультрафиолетовые расходимости. В КЭД указанная проблема решается с помощью перенормировки, в результате которой интегралы по импульсам становятся конечными, то есть перенормировка подавляет вклады от виртуальных фотонов с энергиями ω_k , большими некоторой характерной энергии. При описании спонтанного излучения и лэмбовского сдвига в фотонных кристаллах в качестве такой характерной энергии обычно выбирается масса электрона m_e [3, 4]. Например, в работе [6] для вычисления лэмбовского сдвига используется формула (в естественной системе единиц, в которой $\hbar = c = 1$)

$$E - E_1 \cong \frac{e^2}{6\pi^2 m_e^2} \sum_{n=0}^{\infty} |\mathbf{p}_{1n}|^2 (E - E_n) g(E - E_n), \quad (1)$$

где

$$g(E) = \int_0^{m_e} \frac{k^2 dk}{\omega_k(E - \omega_k)}. \quad (2)$$

Однако с физической точки зрения ограничение области интегрирования в (2) значением m_e не является достаточно обоснованным, поскольку формально уравнение (2) описывает вклад от длинноволновых фотонов, импульсы которых $k \ll m_e$: вклад от коротковолновых фотонов описывается совершенно другой формулой.

В качестве обоснования авторы работ [3, 4, 6] ссылаются на работу Бете [7]. В этой работе при вычислении лэмбовского сдвига в атоме водорода в вакууме Бете использовал прием для устранения расходимостей, суть которого заключается в том, что область интегрирования в конечном выражении для лэмбовского сдвига разделяется на две части: с большими и малыми импульсами. Границу между

этими областями обозначают k_{\min} и называют параметром обрезания. Его величина должна соответствовать определенным физическим требованиям, чтобы можно было использовать соответствующие приближения [5], поэтому его определяют как $(Z\alpha)^2 m \ll k_{\min} \ll (Z\alpha)m$ (например, можно положить $k_{\min} \approx (Z\alpha)^{3/2} m$). Для фотонов с импульсами меньше k_{\min} можно решать задачу в нерелятивистском приближении. Согласно второму порядку теории возмущений сдвиг энергии, вызванный «мягкими» фотонами и обусловленный тем, что электрон в состоянии n испустит и вновь поглотит фотон, равен

$$\Delta E_n^< = e^2 \int_0^{k_{\min}} \frac{d^3 k}{2k(2\pi)^3} \sum_{m, \varepsilon} \frac{\langle n | \alpha \cdot \varepsilon e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | m \rangle \langle m | \alpha \cdot \varepsilon e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | n \rangle}{E_n - k - E_m}, \quad (3)$$

где суммирование производится по поперечным поляризациям и по всем электронным состояниям. В дипольном приближении (в рамках которого, вообще говоря, справедлива квантовая оптика) можно провести интегрирование, которое дает

$$\Delta E_n^< = \frac{2\alpha}{3} [-k_{\min} \langle n | \mathbf{v}^2 | n \rangle + \sum_m \frac{E_m - E_n}{m^2} \ln \frac{|E_m - E_n + k_{\min}|}{|E_m - E_n|} |\langle n | \mathbf{p} | m \rangle|^2]. \quad (4)$$

Далее для этой части вычислений производят перенормировку массы, что в нерелятивистском случае приводит к сдвигу энергии

$$\delta E_n = \frac{1}{2} \delta m \langle n | \mathbf{v}^2 | n \rangle, \quad (5)$$

который имеет ту же структуру, что и первый член в (4). Поэтому последний включается в перенормировку массы. Проводя некоторые переобозначения и суммирования, получаем низкоэнергетическую часть лэмбовского сдвига

$$\Delta E_n^< = \frac{4\alpha(Z\alpha)}{3m^2} \ln \frac{k_{\min}}{\bar{E}} |\psi_{nlm}(0)|^2, \quad (6)$$

где \bar{E} – среднее по всем разностям энергии в атоме. Как следует из этого уравнения, $\Delta E_n^<$ логарифмически растет с увеличением k_{\min} . Однако этот рост компенсируется зависимостью от k_{\min} высокоэнергетического вклада $\Delta E_n^>$. Действительно, как было показано в [5], во втором порядке теории возмущений $\Delta E_n^>$ имеет вид

$$\Delta E_n^> = \frac{4\alpha}{3} \frac{Z\alpha}{m^2} |\psi_{nlm}(0)|^2 \left(\ln \frac{m}{2k_{\min}} + \frac{11}{24} - \frac{1}{5} \right). \quad (7)$$

Суммируя $\Delta E_n^>$ и $\Delta E_n^<$, мы получаем

$$\Delta E_n \approx \frac{4\alpha(Z\alpha)}{3m^2} |\psi_{nlm}(0)|^2 \left(\ln \frac{m}{2\bar{E}} \right). \quad (8)$$

Аналогичный результат получится, если, следуя [6], в формуле (2) ограничить интегрирование массой электрона. Этот формальный прием работает в случае атомов, находящихся в вакууме. Для случая же фотонных кристаллов необходимо последовательно пройти все этапы расчетов. В частности, можно заметить, что вид

первого члена в (4) возникает после взятия интеграла $\int_0^{k_{\min}} \frac{1}{\omega_k} \frac{d^3 k}{\omega_k}$, который в вакууме равен $4\pi k_{\min}$. Однако при проведении процедуры перенормировки из этого

выражения вычитается член, соответствующий поправке к голой массе электрона, безотносительно к окружению частицы, то есть используется тривиальные (линейные) дисперсионные соотношения. Совершенно очевидно, что при проведении аналогичной процедуры в фотонных кристаллах эти два вклада не сокращаются полностью и дают остаток, равный

$$\begin{aligned} F(k_{\min}) &= \int_0^{k_{\min}} d^3k \left(\frac{1}{\omega_k^2} - \frac{1}{\omega_{k0}^2} \right) = \\ &= \int_0^{k_{\min}} d^3k \left(\frac{\omega_{k0}^2 - \omega_k^2}{\omega_k^2 \omega_{k0}^2} \right) = \int_0^{k_{\min}} d^3k \left(\frac{(\omega_{k0} + \omega_k)(\omega_{k0} - \omega_k)}{\omega_k^2 \omega_{k0}^2} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь $\omega_{k0} = |\mathbf{k}|/n_{\text{eff}}$ – линейные дисперсионные соотношения, n_{eff} – показатель преломления эффективной однородной среды, соответствующей данному фотонному кристаллу. Можно представить ω_k в виде $\omega_k = \omega_{k0} + P(\mathbf{k})$, где функция $P(\mathbf{k})$ – это, как правило, малая добавка к ω_{k0} . Пользуясь этим, можно записать

$$F(k_{\min}) \approx 2 \int_0^{\infty} d^3k \frac{P(\mathbf{k})}{\omega_{k0}^3}. \quad (10)$$

Тогда поправка к энергии определяется выражением

$$\Delta E_{pc} = \frac{\alpha}{3\pi} \langle n | \mathbf{v}^2 | n \rangle \int_0^{\infty} d^3k \frac{P(\mathbf{k})}{\omega_{k0}^3}. \quad (11)$$

2. Лэмбовский сдвиг атомов в фотонных кристаллах для изотропной модели

Выше мы показали, что величина лэмбовского сдвига будет напрямую зависеть от вида дисперсионных соотношений в фотонном кристалле. Различают два случая фотонных кристаллов: анизотропные и изотропные. В первом случае учитывается зависимость параметров от углов, во втором ею пренебрегают. Несмотря на то что реальные фотонные кристаллы, как правило, являются анизотропными, основное внимание мы уделяем рассмотрению лэмбовского сдвига именно в изотропном случае ввиду того, что при этом можно явно проанализировать ультрафиолетовое поведение амплитуд. В работе [8] была использована простая модель дисперсионных соотношений для описания одной запрещенной зоны

$$\omega_{\mathbf{k}} = \text{sgn}(k - k_0) \sqrt{(k - k_0)^2 + \gamma^2} + \sqrt{k_0^2 + \gamma^2}, \quad (12)$$

где k_0 и γ – параметры, относящиеся к диэлектрической микроструктуре. Ее преимуществом является то, что она хорошо описывает поведение дисперсионных соотношений в пределе больших и малых частот. Соответствующая ей функция $P(k)$ принимает вид

$$P(k) = \text{sgn}(k - k_0) \sqrt{(k - k_0)^2 + \gamma^2} + \sqrt{k_0^2 + \gamma^2} - k. \quad (13)$$

Однако легко заметить, что при $k \gg k_0$

$$P(k) \simeq (\sqrt{k_0^2 + \gamma^2} - k_0) = \text{const}. \quad (14)$$

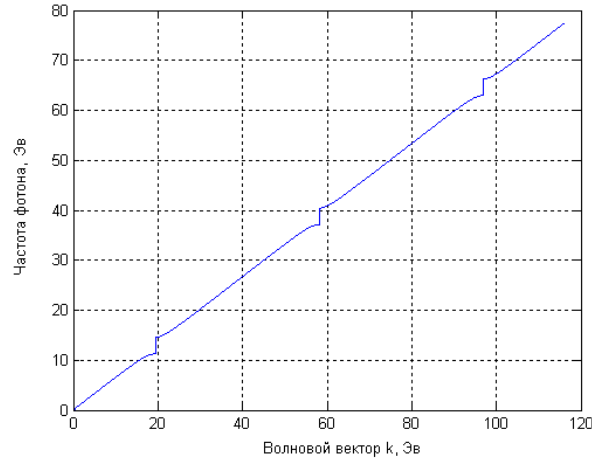


Рис. 1. Дисперсионные соотношения в изотропном случае, $n = 1.5$, $a = 50$ нм, $L = 200$ нм

Это означает, что интеграл в (??) будет расходиться логарифмически.

Такая же расходимость возникает при использовании других дисперсионных соотношений, полученных методом разложения по плоским волнам:

$$\omega_{1,2}(k) = \sqrt{\frac{k^2 + (k-g)^2 \pm \sqrt{(k^2 - (k-g)^2)^2 + 4k^2(k-g)^2 \varepsilon_1^2 / \varepsilon_0^2}}{2\varepsilon_0(1 - \varepsilon_1^2 / \varepsilon_0^2)}}, \quad (15)$$

где g – вектор обратной решетки, ε_0 и ε_1 – нулевая и первая Фурье-компоненты периодической диэлектрической функции $\varepsilon(x) = \varepsilon(x + a + b)$ соответственно.

Тот факт, что после проведения процедуры перенормировки расходимость сохраняется, свидетельствует о неприменимости здесь стандартных методов КЭД, что было подчеркнуто выше. Следует также отметить, что такой важный параметр, как сходимость или расходимость интегралов, оказывается зависящим от свойств кристалла и выбора модели дисперсионных соотношений. Однако все эти вопросы выходят за рамки данной статьи, поэтому, чтобы избежать этих проблем, дисперсионные соотношения выберем вслед за авторами работы [3] в виде

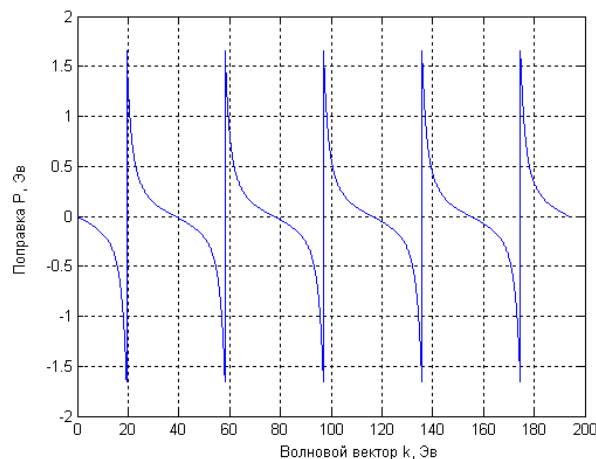
$$4n \cos(kL) = (1+n)^2 \cos\left[(2na+b)\frac{\omega_k}{c}\right] - (1-n)^2 \cos\left[(2na-b)\frac{\omega_k}{c}\right], \quad (16)$$

где n – показатель преломления материала рассеивателя, a – его радиус, L – постоянная решетки. В частном случае $2na = b$ вид этих дисперсионных соотношений приведен на рис. 1. В частном случае $2na = b$ вид этих дисперсионных соотношений приведен на рис. 1. Соответствующая им функция $P(k)$ представлена на рис. 2.

В этом случае мы получаем конечное выражение для лэмбовского сдвига. $\Delta E_{1S}^{pc} = -4.21 \cdot 10^{-7}$ эВ, $\Delta E_{2S}^{pc} = \Delta E_{2P}^{pc} = -1.05 \cdot 10^{-7}$ эВ

Заключение

Мы показали, что при описании лэмбовского сдвига в атомах, находящихся в фотонных кристаллах, возникают фундаментальные проблемы, которые требуют более осторожного и последовательного использования стандартной КЭД. Физически необоснованное использование подстановки тех или иных значений в качестве

Рис. 2. Поведение функции $P(k)$

верхнего предела интегрирования в выражениях для лэмбовского сдвига может привести к ситуации, при которой результаты расчетов будут зависеть от способа регуляризации. Как следствие, непосредственное заимствование методов стандартной КЭД для вакуума в случае фотонных кристаллов не позволяет учесть все особенности данной проблемы. Мы показали, что лэмбовский сдвиг энергетических уровней атомов в фотонных кристаллах отличается нетривиальным образом от этого сдвига в атомах в вакууме вследствие того, что дисперсионные соотношения имеют нелинейную форму. Важным является то, что нетривиальные поправки по порядку величины оказались сопоставимыми с лэмбовским сдвигом в обычных атомах.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ НШ-2965.2008.2.

Summary

R.Kh. Gainutdinov, E.V. Zaitseva, M.A. Khamadeev. Lamb Shift of Atoms in Photonic Crystals.

The problem of interaction of an atom in a photonic crystal with its own radiation field is investigated. It is shown that the Lamb shift of the energy levels of an atom in a photonic crystal is significantly different from that of atoms in vacuum. The effects of the dispersion relations on the Lamb shift of atoms in photonic crystal are discussed.

Key words: photonic crystal, Lamb shift.

Литература

1. *Joannopoulos J.D., Meade R.D., Winn J.N.* Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. – Princeton: Princeton Univ. Press, 1995. – 184 p.
2. *Johnson S.G., Joannopoulos J.D.* Photonic Crystals: The Road from Theory to Practice. – Boston: Kluwer, 2002. – 160 p.
3. *John S., Wang J.* Quantum optics of localized light in a photonic band gap // *Phys. Rev. B.* – 1991. – V. 43, No 16. – P. 12772–12789.

4. *Zhu Shi-Yao, Yang Yaping, Chen Hong, Zheng Hang, Zubairy M.S.* Spontaneous Radiation and Lamb Shift in Three-Dimensional Photonic Crystals // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V. 84, No 10. – P. 2136–2139.
5. *Бьеркен Дж.Д., Дрелл С.Д.* Релятивистская квантовая теория. Т. 1. Релятивистская квантовая механика. – М.: Наука, 1978. – 295 с.
6. *John S., Wang J.* Quantum Electrodynamics near a Photonic Band Gap: Photonic Bound States and Dressed Atom // *Phys. Rev. Lett.* – 1990. – V. 64, No 20. – P. 2418–2421.
7. *Bethe H.A.* The Electromagnetic Shift of Energy Levels // *Phys. Rev.* – 1947. – V. 72, No 4. – P. 339–341.
8. *John S., Quang T.* Localization of Superradiance near a Photonic Band Gap // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – V. 74, No 17. – P. 3419–3422.

Поступила в редакцию
16.01.09

Гайнутдинов Ренат Хамитович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры оптики и нанофотоники Казанского государственного университета.

E-mail: *Renat.Gainutdinov@ksu.ru*

Зайцева Екатерина Валериевна – студент кафедры оптики и нанофотоники Казанского государственного университета.

Хамадеев Марат Актасович – аспирант кафедры оптики и нанофотоники Казанского государственного университета.

E-mail: *Marat.Khamadeev@ksu.ru*